

КВАНТОВО-ТОПОЛОГИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ 3,4-ДИГИДРО-1Н-ПИРИМИДИН-2-ОНА

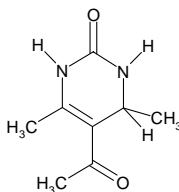
Рыкунов А.А.¹, Потемкин В.А.¹, Сташ А.И.² Цирельсон В.Г.³

Челябинский государственный университет¹

Научно-исследовательский физико-химический институт, Москва²

Российский химико-технологический университет, Москва³

Производные 3,4-дигидро-1Н-пиримидин-2-она имеют широкий спектр биологической активности и используются при лечении доброкачественной гиперплазии простаты и как антигипертензивные средства. Для установления природы этих свойств важно сопоставление топологических особенностей распределения электронной плотности, полученных экспериментальными и теоретическими методами, для соединений данного ряда.



Объектом исследования является молекула 5-ацетил-4,6-диметил-3,4-дигидро-1Н-пиримидин-2-она. В ходе низкотемпературного прецизионного рентгеноструктурного анализа получена информация о распределении электронной плотности в кристалле. Квантово-топологический расчет (DFT B3LYP/6-311G(d,p)) данной молекулы проведен для экспериментальной геометрии. Полученные экспериментальные и теоретические электронные плотности использовали для расчета лапласиана электронной плотности, а также параметров критических точек электронной плотности и интегральных атомных характеристик (использовались программа WinXPRO и модифицированный пакет программ AIMPAC). Полученные характеристики атомов хорошо коррелируют с соответствующими экспериментальными данными. Параметры критических точек электронной плотности близки, а лапласиан электронной плотности в теории и эксперименте различается. Наибольшие отклонения получены для связей, находящихся на периферии молекулы и участвующих в межмолекулярных взаимодействиях (например, связей N-H). Для внутренних связей стандартные отклонения для λ_1 и λ_2 составляют около 5%, отклонение для λ_3 равно 32%. Из анализа распределения электронной плотности определено, что наибольшей реакционной способностью обладают атомы углерода при двойной связи гетероцикла.

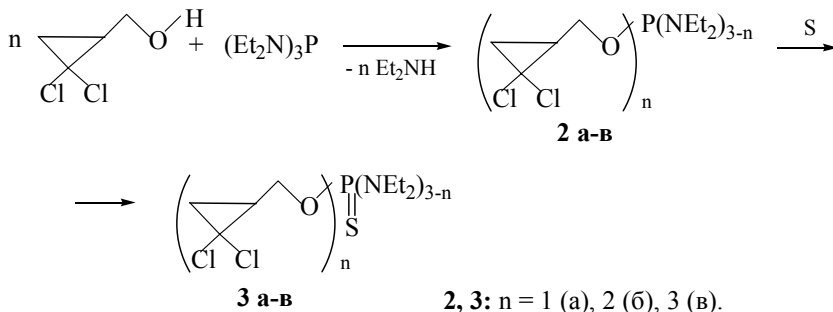
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 04-03-33053) и Российского федерального агентства по образованию (программа "Развитие научного потенциала высшей школы, 2006 – 2008, Проекты 5051, 9693).

РЕАКЦИИ 2,2-ДИХЛОРЦИКЛОПРОПИЛМЕТАНОЛА С ГЕКСАЭТИЛТРИАМИДОФОСФИТОМ

Викторова О.Ю., Митрасов Ю.Н., Кондратьева О.В., Скворцов В.Г.

Чувашский государственный педагогический университет, Чебоксары

Циклопропилфосфаты представляют повышенный интерес в качестве биологически активных веществ. Ранее, для синтеза таких фосфатов нами были предложены реакции 2,2-дихлорциклопропилметанола (**1**) с диалкилфосфитами по Тодду-Атертону [1]. В продолжение этих работ, с целью расширения методов синтеза фосфорилированных циклопропанов, нами изучено взаимодействие гексаэтилтриамидофосфита со спиртом (**1**). Реакции проводили при различных (1:1-3) мольных соотношениях, что позволило получить как 2,2-дихлорциклопропилметилдиэтиламидофосфиты (**2а,б**) так и трис(2,2-дихлорциклопропилметил)фосфит (**2в**). Фосфиты (**2а-в**) дают положительную качественную реакцию с хлоридом меди (I) и легко присоединяют серу с образованием соответствующих тиофосфатов (**3а-в**).



Чистоту соединений (**2а-в**, **3а-в**) контролировали данными ТСХ, а строение подтверждали методами ИК и ЯМР ¹Н спектроскопии. Тиофосфаты (**3а-в**), как показали исследования по определению энергии прорастания и лабораторной всхожести семян злаковых культур, обладают повышенной биологической активностью.

1. Митрасов Ю.Н., Илларионова А.А., Анисимова Е.А., Мартынова Л.П. // Ж. общей химии. 2000. Т. 70. Вып. 11. С. 1929-1930.